Nun wird ein Teilchen, sagen wir, das l-te, aus dem System entfernt. Nehmen Sie an, daß die Wellenfunktionen der anderen Teilchen dabei unverändert bleiben. Zeigen Sie, daß gilt (Koopman Theorem)

$$E_N = E_{N-1} + \epsilon_l, \tag{5}$$

wobei ϵ_l die Hartree-Fock Energie des beim Übergang von N zu $N-1$ Teilchen entfernten Elektrons ist.

Die Gültigkeit dieses Theorems ist natürlich an die Bedingung, daß sich die Wellenfunktionen der anderen Elektronen nicht ändern dürfen, gekoppelt. Für sehr große Systeme wie Festkörper ist dies gut erfüllt, allerdings nicht in Systemen mit wenigen Teilchen wie z.B. Atomen.

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. Ch. Jurecka

THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK SS 1999

4. Übungsblatt

9. Hartree-Fock Theorie des Jellium Modells

Ein einfaches Modell für einen Festkörper ist die Ersetzung des gitterperiodischen Potentials durch einen konstanten Ladungshintergrund mit Ladungsdichte $\rho_{pos} = \frac{Ne}{V}$ (Jellium-Modell). Das Gitterpotential ist damit

$$V_G = -\frac{Ne^2}{V}\int \frac{d^3r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{1}$$

die Hartree-Fock Gleichung für dieses Modell ist

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_G(r) + \sum_{k'}\int d^3r' \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\left(2|\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')|^2 - \frac{\varphi^*_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}')\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})}{\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}\right)\right]\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{2}$$

(a) Zeigen Sie, daß im Fall ebener Wellen, also $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{kr}}$, der Hartree (direkte) Term im Hartree-Fock Potential genau das Gitterpotential V_G kompensiert.

(b) Zeigen Sie außerdem, daß ebene Wellen die obige Hartree-Fock Gleichung lösen.

(c) Berechnen Sie die Eigenwerte ϵ_k.

Anleitung: Substituieren Sie zunächst im Integral geeignet. Nun sollten Sie folgende Beziehung verwenden (Fouriertransformation des Coulombpotentials):

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{V}\sum_k \frac{4\pi}{k^2}e^{i\mathbf{kz}}. \tag{3}$$

Die nun noch auftretende k-Raum Summe läßt sich durch Umwandlung in ein Integral lösen.

10. Koopman Theorem oder zur Bedeutung der Lagrangeparameter ϵ_l

Der Erwartungswert des Hamiltonoperators mit einer Slaterdeterminante von N Funktionen $\varphi_i(x)$ ist (siehe Vorlesung)

$$\begin{aligned} E_N &= \sum_{i=1}^{N}\int dx\varphi_i^*(x)\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_G(\mathbf{r})\right]\varphi_i(x) + \\ &\quad \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}\int\int dxdx' V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')[\varphi_i^*(x)\varphi_j^*(x')\varphi_j(x')\varphi_i(x) - \\ &\quad \varphi_i^*(x)\varphi_j^*(x')\varphi_i(x')\varphi_j(x)]. \end{aligned} \tag{4}$$